§ Origem do nome 'Segunda Quantização'

Idéia dos 'Pais Fundadores' de encontrar uma interpretação em termo de partículas de qualquer campo quântico & um pouco de Teoria Clássica de Campos.

Olhamos de maneira diferente a equação de Schrödinger

$$(1)\quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\varphi(\vec{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi(\vec{x},t) + V(\vec{x})\varphi(\vec{x},t),$$

como sendo a equação diferencial de um campo $\varphi(\vec{x},t)$. Seja ela definida numa região R do espaço tempo

2ª Quantização: transformar a função de onda quântica (1ª quantização) num operador.

$\varphi(\vec{x},t)$, como operador campo depende do tempo, de maneira que estaremos trabalhando na versão de Heisenberg, com equação dinâmica:

$$\frac{d}{dt}\varphi = \frac{i}{\hbar}\left[\mathbb{H},\varphi\right] \qquad (2)$$

A tarefa é então encontrar o Hamiltoniano

$\hat{H}$ do campo, de maneira que a eq. (2) conduza a eq. (1).

Precisamos também encontrar o operador conjugado do operador campo $\hat{\varphi}(\vec{x},t)$.

Estratégia: Considerar a eq. (1) da 1ª quantização como uma teoria clássica de campos; encontrar uma ação clássica e formular um princípio de 'mínima ação' para obter as equações de campo; usar a Ação para obter o Hamiltoniano do campo e a variável conjugada do campo.

Por conveniência, usamos a notação relativística para as variáveis. A Ação define uma 'Densidade Lagrangiana' que fornece as eq.'s de campo:

$$S[\varphi] = \int_R d^4x \, \mathcal{L}(\varphi, \partial_\mu \varphi) \, , \quad (\mu = 0,1,2,3)$$

com $\partial_\mu \varphi \equiv \dfrac{\partial \varphi}{\partial x^\mu}$. O caso mais geral (que inclui acoplamento com fontes externas) também tem dependência explícita em x^μ:

$$\mathcal{L}_0 \longrightarrow \mathcal{L}_0(\varphi, \partial_\mu \varphi, x^\mu)$$

Queremos calcular a variação δS da Ação e obter o caso estacionário, com a condição de contorno que variações do campo e das coordenadas são nulas na fronteira ∂R do domínio R

Variações independentes $\begin{cases} x^\mu \longrightarrow x'^\mu = x^\mu + \delta x^\mu \\ \varphi(x) \longrightarrow \varphi'(x) = \varphi(x) + \delta\varphi(x) \end{cases}$

Existe também a variação total do campo:

$$\varphi'(x') = \varphi(x) + \Delta\varphi(x),$$

com $\Delta\varphi(x) = \varphi'(x') - \varphi(x)$

$$= \varphi(x') + \delta\varphi(x') - \varphi(x)$$

1ª ordem

$$= \cancel{\varphi(x)} + \delta x^\mu \left(\partial_\mu \varphi(x)\right) + \delta\varphi(x) - \cancel{\varphi(x)}$$

resulta:

$$\Delta\varphi(x) = \delta\varphi(x) + \delta x^\mu \left(\partial_\mu \varphi(x)\right)$$

A variação da Ação é dada por:

$$\delta S = \int_{R'} d^4x' \, \mathcal{L}(\varphi', \partial_\mu \varphi', x'^\mu) -$$

$$- \int_{R} d^4x \, \mathcal{L}(\varphi, \partial_\mu \varphi, x^\mu)$$

Para a mudança de variável, temos

$$d^4x' = J\left(\frac{x'}{x}\right) d^4x \quad ,$$

onde J é o Jacobiano da transformação $x^\mu \longrightarrow x'^\mu$

$$J = \det\left(\frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\alpha}\right)$$

Como temos : $\quad x'^\mu = x^\mu + \delta x^\mu$

$$\Rightarrow \qquad \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\alpha} = \delta^\mu_\alpha + \partial_\alpha(\delta x^\mu) =$$

$$= \delta^\mu_\alpha + \delta(\partial_\alpha x^\mu).$$

No determinante, em 1ª ordem, só temos contribuição dos elementos diagonais:

$$J = \det\left(\frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\alpha}\right) \cong \left[1 + \partial_0(\delta x^0)\right]\left[1 + \partial_1(\delta x^1)\right] \times$$

$$\times \left[1 + \partial_2(\delta x^2)\right]\left[1 + \partial_3(\delta x^3)\right] \simeq$$

$$\simeq 1 + \partial_\mu(\partial x^\mu)$$

Fazendo a substituição em δS obtemos:

$$\delta S = \int_R d^4x \Big\{ \left[1 + \partial_\lambda(\delta x^\lambda)\right] \Big[\mathcal{L}_0(\varphi, \partial_\mu\varphi, x^\mu) +$$

$$+ \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \varphi} \Delta\varphi(x) + \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial(\partial_\mu \varphi)} \Delta\partial_\mu\varphi(x) +$$

$$+ \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial x^\mu} \delta x^\mu \Big] - \mathcal{L}_0(\varphi, \partial_\mu\varphi, x^\mu) \Big\} =$$

$$= \int_R d^4x \Big[\mathcal{L}_0\, \partial_\lambda(\delta x^\lambda) + \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \varphi} \Delta\varphi + \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial(\partial_\mu\varphi)} \Delta(\partial_\mu\varphi)$$

$$+ \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial x^\mu} \delta x^\mu \Big] \quad \text{-----} (*)$$

Note que o símbolo Δ é definido como uma variação avaliada em pontos diferentes do espaço, de maneira que não temos:

$$\Delta(\partial_\mu \varphi) = \partial_\mu(\Delta\varphi)$$

Passamos $(*)$ para as variações δ, usando as relações anteriores

Mas consideramos um processo variacional, onde as coordenadas não são variadas, $\delta x^\mu \equiv 0$, conservando no processo o mesmo volume R do domínio. Neste caso, só temos variações virtuais do campo φ:

$$\Delta\varphi \Rightarrow \delta\varphi = \varphi'(x) - \varphi(x) = \delta\varphi(x)$$

$$\Delta(\partial_\mu\varphi) \Rightarrow \delta(\partial_\mu\varphi) \equiv \partial_\mu\varphi'(x) - \partial_\mu\varphi(x)$$

$$= \partial_\mu\left[\varphi'(x) - \varphi(x)\right] = \partial_\mu(\delta\varphi)$$

e agora sim temos

$$\delta\,\partial_\mu = \partial_\mu\,\delta$$

As variações $\delta\varphi(x)$ satisfazem as condições de contorno

$$\delta\varphi(x) = 0, \text{ em } \partial R.$$

Este caso, de variações 'internas' é análogo ao caso da Mecânica Clássica, para Lagrangianos conservativos.

Agora, a variação da Ação fica como:

$$\delta S = \int d^4x \left[\frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \varphi} \delta\varphi + \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial(\partial_\mu \varphi)} \delta(\partial_\mu \varphi) \right].$$

Considerando a proprieda $\delta \partial_\mu = \partial_\mu \delta$, o 2º termo pode ser integrado por partes:

$$\frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial(\partial_\mu \varphi)} \partial_\mu(\delta\varphi) = \partial_\mu \left[\delta\varphi \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial(\partial_\mu \varphi)} \right] - \delta\varphi\, \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial(\partial_\mu \varphi)},$$

gerando um termo que é um divergente total. Ele pode ser transformado numa integral de fluxo para a hiper-superfície ∂R do domínio R:

$$\delta S = \int_{\partial R} d\sigma_\mu \left[\delta\varphi \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial(\partial_\mu \varphi)} \right] + \int_R d^4x \, [\mathcal{L}_0]_\varphi \, \delta\varphi,$$

onde o símbolo $[\mathcal{L}_0]_\varphi$ é:

$$[\mathcal{L}_0]_\varphi \equiv \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \varphi} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial(\partial_\mu \varphi)}$$

Como $\delta\varphi \equiv 0$ em ∂R, obtemos:

$$\delta S = \int d^4x \, \delta\varphi \, [\mathcal{L}_0]_\varphi$$

No caso de Ação <u>estacionária</u> $\Rightarrow \delta S = 0$

Como a variação do campo $\delta\varphi(x)$ é arbitrária, isso implica nas equações de Euler-Lagrange

$$\boxed{[\mathcal{L}]_{\varphi} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \varphi)} = 0,} \qquad (3)$$

que são as equações diferenciais satisfeita pelo campo (neste caso tratamos um campo escalar, de maneira que temos uma equação de Lagrange).

Note que:

1. A função de onda φ de Schrödinger é complexa. φ^* pode ser considerada como um campo independente. A Densidade Lagrangiana $\mathcal{L}$ deverá depender de φ e φ^*. Neste caso, a variação da ação terá a forma:

$$\delta S = \int_R d^4x \left\{ [\mathcal{L}]_{\varphi}\, \delta\varphi + [\mathcal{L}]_{\varphi^*}\, \delta\varphi^* \right\}$$

e as eq.'s de Euler-Lagrange serão:

$$[\mathcal{L}]_{\varphi^*} = 0, \quad \text{para } \varphi,$$

e

$$[\mathcal{L}]_{\varphi} = 0, \quad \text{para } \varphi^*.$$

2. Construção da Densidade Lagrangiana

Escrevemos a eq. de Schrödinger como:

$$\left.\begin{array}{l} V\varphi - i\hbar\partial_t\varphi - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi = 0 \,, \\ \text{e a sua complexa conjugada como:} \\ V\varphi^* + i\hbar\partial_t\varphi^* - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi^* = 0 \,. \end{array}\right\} \quad (4)$$

Notação: $\partial_t\varphi = \dot{\varphi}$, $\partial_t\varphi^* = \dot{\varphi}^*$

No âmbito não relativístico, escrevemos as eqs. de Euler-Lagrange como:

$$(5)\left\{\begin{array}{l} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi^*} - \partial_t\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\varphi}^*} - \nabla\cdot\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\nabla\varphi^*} = 0\,, \\ \\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi} - \partial_t\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\varphi}} - \nabla\cdot\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\nabla\varphi} = 0\,, \end{array}\right.$$

e comparamos com (4):

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi^*} = V\varphi\,, \qquad \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi} = V\varphi^*$$

sugere que $\mathcal{L}$ tem um termo $V\varphi^*\varphi$. Também

$$-i\hbar\,\partial_t \varphi = -i\hbar\dot{\varphi} = -\partial_t \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{\varphi}^*},$$

$$i\hbar\,\partial_t \varphi^* = -\partial_t \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{\varphi}},$$

sugere que

$$\partial_t \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{\varphi}^*} = i\hbar\,\partial_t \varphi \Rightarrow \mathcal{L}_0 = i\hbar\,\varphi\dot{\varphi}^* \ldots$$

$$-\partial_t \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{\varphi}} = i\hbar\,\partial_t \varphi^* \Rightarrow \mathcal{L}_0 = -i\hbar\,\dot{\varphi}\varphi^*$$

e a integração parcial fornece:

$$\mathcal{L}_0 = i\hbar\left(\varphi\dot{\varphi}^* - \dot{\varphi}\varphi^*\right) \ldots$$

Finalmente:

$$-\nabla\cdot\frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \nabla\varphi^*} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\nabla\varphi \Rightarrow \mathcal{L}_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\varphi\cdot\nabla\varphi^* + \ldots$$

que é simétrico em $\nabla\varphi$ e $\nabla\varphi^*$. Por conveniência trocamos um sinal (sem efeito para as eq:s de Euler-Lagrange), tentando:

$$(6)\quad \boxed{\mathcal{L}_0 = i\hbar\left(\dot{\varphi}\varphi^* - \varphi\dot{\varphi}^*\right) - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\varphi\cdot\nabla\varphi^* - V\varphi\varphi^*}$$

Podemos verificar que a Densidade Lagrangiana (6) fornece a eq. de Schrödinger para φ (e sua complexa conjugada).

Calculamos os momentos canônicos com a Densidade Lagrangiana (6):

$$\left.\begin{aligned} \pi &\equiv \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{\varphi}} = i\hbar\varphi^*, \\ \pi^* &= \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{\varphi}^*} = -i\hbar\,\varphi. \end{aligned}\right\} \quad (7)$$

De pose dos momentos canônicos, podemos obter uma Densidade Hamiltoniana através de uma Transformação de Legendre, que muda das 'velocidades generalizadas' para os momentos:

$$\mathcal{H}_0 = \pi\dot{\varphi} + \pi^*\dot{\varphi}^* - \mathcal{L}_0 =$$

$$= i\hbar\left(\dot{\varphi}\varphi^* - \varphi\dot{\varphi}^*\right) - \mathcal{L}_0 =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\varphi^*\cdot\nabla\varphi + V\varphi^*\varphi$$

e finalmente o Hamiltoniano H do campo é obtido por integração de $\mathcal{H}_0$:

$$H = \int d^3x \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \varphi^* \cdot \nabla \varphi + V \varphi^* \varphi \right]. \qquad (8)$$

Note que este Hamiltoniano não deve ser confundido com o Hamiltoniano da teoria de Schrödinger na 1ª quantização. H está associado ao 'campo de matéria' representado por φ (e as partículas que acompanham ao campo, uma vez realizada a 2ª quantização).

Mudança 'cosmética':

$$\nabla \varphi^* \cdot \nabla \varphi = \nabla \cdot (\varphi^* \nabla \varphi) - \varphi^* \nabla^2 \varphi.$$

O termo com 'Divergente' fornece fluxo nulo em ∞, de maneira que re-escrevemos o Hamiltoniano como:

$$H = \int d^3x \, \varphi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \varphi \,, \qquad (9)$$

que é a mesma forma encontrada em 2ª quantização, transformando as funções de onda em operadores:

$$\varphi \longrightarrow \text{operador de campo } \varphi,$$

$$\varphi^* \longrightarrow \text{operador adjunto } \varphi^\dagger.$$

A mesma coisa é feita com os momentos (π, π^*).

Quantizamos o campo seguindo a receita de Heisenberg com as relações de incerteza:

$$(10) \qquad [\varphi(\vec{x},t), \pi(\vec{x}',t)] = i\hbar\, \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}'),$$

que é o análogo de $[x_j, p_k] = i\hbar\, \delta_{jk}$, para a coordenada e o momentum canônico. Mas temos que, de (7),

$$[\varphi(\vec{x},t), \pi(\vec{x}',t)] = i\hbar\, [\varphi(\vec{x},t), \varphi^\dagger(\vec{x}',t)],$$

resultando:

$$[\varphi(\vec{x},t), \varphi^\dagger(\vec{x}',t)] = \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}'), \qquad (11)$$

onde os comutadores a tempos iguais são pensados na versão de Heisenberg.

A relação de comutação (11) carateriza um campo de bósons (como seria de esperar).

Completamos as relações de comutação:

$$(12) \quad \left[\varphi(\vec{x},t), \varphi(\vec{x}',t) \right] = 0, \quad \left[\varphi^{\dagger}(\vec{x},t), \varphi^{\dagger}(\vec{x}',t) \right] = 0,$$

que são os análogos de $[x_j, x_k] = 0 = [p_j, p_k]$.

<u>Pergunta</u>: Como passar para a representação de partícula?

Chamamos de $h(\vec{x},\vec{p})$ o Hamiltoniano da teoria de Schrödinger:

$$h = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x}),$$

expressado na representação de coordenadas. As autofunções de tal operador satisfazem

$$h\,\phi_i(\vec{x}) = \varepsilon_i\,\phi_i(\vec{x}) = \varepsilon_i \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle$$

$$= \langle \vec{x} | h | \lambda_i \rangle .$$

A solução geral da função de onda $\varphi(\vec{x})$ é dada por uma superposição dessas autofunções:

$$\varphi(\vec{x}) = \sum_i a_i\,\phi_i(\vec{x})$$

e na versão de Heisenberg:

$$\varphi(\vec{x},t) = \sum_i a_i(t)\, \phi_i(\vec{x}).$$

Se na 2ª quantização, φ é um operador, devemos considerar os coeficientes da expansão como operadores de um espaço de Hilbert. Temos (Schrödinger)

$$\varphi(\vec{x}) = \sum_i a_i \phi_i(\vec{x}), \quad \varphi^{\dagger}(\vec{x}) = \sum_j a_j^{\dagger} \phi_j^{*}(\vec{x}).$$

Substituímos na relação de comutação:

$$\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}') = \left[\varphi(\vec{x}), \varphi^{\dagger}(\vec{x}')\right] =$$

$$= \sum_{i,j} \left[a_i, a_j^{\dagger}\right] \phi_i(\vec{x})\, \phi_j^{*}(\vec{x}')$$

A 'Delta' de Dirac é obtida no caso que

$$\left[a_i, a_j^{\dagger}\right] = \delta_{ij}$$

Resulta:

$$\left[\varphi(\vec{x}), \varphi^{\dagger}(\vec{x}')\right] = \sum_i \phi_i^{*}(\vec{x}')\, \phi_i(\vec{x}) =$$

$$= \langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}')$$

As outras relações de comutação conduzem a:

$$[a_j, a_k] = 0\,, \quad [a_j^\dagger, a_k^\dagger] = 0\,. \qquad (13)$$

Temos assim dado uma interpretação de partículas para o campo quântico. Escrevemos na representação de partículas do campo, o Hamiltoniano do sistema na 2ª quantização:

$$H = \int d^3x\, \varphi^\dagger(\vec{x})\, h(\vec{x},\vec{p})\, \varphi(\vec{x}) =$$

$$= \sum_{j,k} a_j^\dagger a_k \int d^3x\, \phi_j^*(\vec{x}) \left[h\, \phi_k(\vec{x}) \right] =$$

$$= \sum_{j,k} a_j^\dagger a_k\, \varepsilon_k\, \delta_{jk} =$$

$$= \sum_j \varepsilon_j\, a_j^\dagger a_j\,.$$

Ou seja:

$$\boxed{H = \sum_k a_k^\dagger a_k \cdot \varepsilon_k} \qquad (14)$$

e apartir daqui, podemos gerar os espaços de números de ocupação.